تأثیر تابع پتانسیل بر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند ماشین‌کاری نانومتری سیلیکون تک‌کریستال*

سیدنادر عاملی کلخوران(۱) مهرداد وحدتی(۲)

چکیده *فرآیند ماشین‌کاری نانومتری روشی پیشرفته جهت ساخت قطعات ترد سیلیکونی با صافی سطح نانومتری می‌باشد. با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی این فرآیند می‌توان به جزئیات ارزشمندی از مکانیزم ماشین‌کاری دست یافت. انتخاب تابع پتانسیل مناسب، اصلی‌ترین پارامتر در تعیین نتایج یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌باشد. در این مقاله از ترکیب سه تابع پتانسیل مورس، ترسوف و استیلینگر-وبر جهت تعریف اندرکنش‌های بین ذره‌ای استفاده شده است. مکانیزم ماشین‌کاری، دمای قطعه‌کار، نیروهای ماشین‌کاری، انرژی سیستم و آسیب‌های زیر سطحی قطعه‌کار مواردی بودند که جهت مقایسه این توابع پتانسیل مورد مطالعه قرار گرفتند. نتایج نشان داد که استفاده از ترکیب تابع پتانسیل مورس و ترسوف، سبب تغییر مکانیزم ماشین‌کاری به حالت ترد گردیده و انرژی سیستم را تا حد ۷٫۳ ٪ کاهش می‌دهد. همچنین مشخص گردید که اندرکنش بین اتم‌های ابزار و قطعه‌کار تأثیر بیشتری در تعیین دمای قطعه‌کار و نیروهای ماشین‌کاری دارد.*

واژه‌های کلیدی ماشین‌کاری نانومتری، دینامیک مولکولی، تابع پتانسیل، سیلیکون.

The Effect of Interatomic Potential Function on Nanometric Machining of Single Crystal Silicon

S.N. Ameli Kalkhoran M. Vahdati

Abstract *Nanometric machining process is an advanced method for producing brittle silicon workpiece with nano-level surface finish. With the aid of molecular dynamics simulation, valuable details of machining mechanism could be obtained. Choosing the appropriate potential function is the main parameter in determining the results of this simulation. In this paper, the combination of the three potential functions of Morse, Tersoff, and Stillinger-Weber is used to define interatomic interactions. The machining mechanism, workpiece temperature, cutting forces, systems' energy as well as subsurface damages were studied to compare these potential functions. The results exhibit that using the combination of the Morse and Tersoff potential function would change the machining mechanism to brittle mode and reduce the system energy by as much as 7.3%. It is also found that the interaction between tool and workpiece has a greater influence on the determination of the workpiece temperature and machining forces.*

Key Words Nanometric Machining, Molecular Dynamics, Potential Function, Silicon.

*تاریخ دریافت مقاله ۹۷/۱/۲۱ و تاریخ پذیرش آن ۹۷/۱۲/۵ می‌باشد. DOI: 10.22067/fum-mech.v30i2.71972

(۱) نویسندهٔ مسئول: دانشجوی دکتری، گروه ساخت و تولید، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران.
naderameli@mail.kntu.ac.ir

(۲) دانشیار، گروه ساخت و تولید، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران.

مقدمه

امروزه استفاده‌های فراوانی از قطعات سیلیکونی در ساخت تراشه‌ها و قطعات رایانه‌ای می‌شود. این ماده با دارا بودن ویژگی‌هایی چون دسترس‌پذیری، پایداری و مقاومت سایشی بالا، محبوبیت بسیاری را در ساخت قطعات دقیق کسب کرده است. با این حال، با توجه به ترد بودن سیلیکون، ماشین‌کاری آن به روش سنتی دارای محدودیت‌های فراوانی می‌باشد [1]. بطور مثال با استفاده از فرآیندهای لیسه‌کاری (Lapping) و پرداخت‌کاری، فقط می‌توان سطوح ساده را ماشین‌کاری نمود و ساخت قطعات پیچیده میسر نمی‌باشد [2]. فرآیند ماشین‌کاری نانومتری، روشی پیشرفته جهت ساخت قطعات فوق‌دقیق می‌باشد. بطور کلی سطوح حاصل از ماشین‌کاری نانومتری از کیفیت و دقت ابعادی بالاتری نسبت به دیگر روش‌های ماشین‌کاری برخوردار می‌باشد. علاوه بر این، در این روش واکنش شیمیایی و آسیب‌های کمتری در سطح قطعه‌کار حاصل می‌گردد. لذا این فرآیند کاربرد فراوانی در صنایع الکترونیک، اپتیک و پزشکی پیدا کرده است. با استفاده از این روش می‌توان قطعات ترد مانند سیلیکون را به خوبی ماشین‌کاری کرده و به صافی سطح نانومتری دست یافت. با این حال، انجام آزمایشات تجربی در این زمینه بسیار هزینه‌بر بوده و همواره با محدودیت‌هایی همراه بوده است. با توجه به ناکارآمد بودن مبانی مکانیک پیوسته در ابعاد نانومتری، نمی‌توان از روش اجزاء محدود جهت شبیه‌سازی این فرآیند استفاده کرد. همچنین خواص مواد در مقیاس نانومتری متفاوت از مقدار ماکروسکوپی آن می‌باشد. این موضوع دلیلی دیگر در ناتوانی روش اجزاء محدود در مطالعه فرآیند ماشین‌کاری نانومتری است.

از این روی، تکنیک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تبدیل به روشی کارآمد جهت انجام تحقیقات این حوزه گردیده است [3]. با استفاده از این روش می‌توان به درک کامل‌تری از جزئیات مکانیزم ماشین‌کاری نانومتری قطعات ترد از جمله سیلیکون دست یافت.

پارامترهای بسیاری بر صحت خروجی‌های حاصل از یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌توانند تأثیرگذار باشند. تعریف صحیح اندرکنش بین ذرات یکی از این موارد می‌باشد که در صورت انتخاب بهینه می‌تواند تأثیر به سزایی در تقریب رفتار یک سیستم واقعی داشته باشد. این اندرکنش‌ها توسط تابع پتانسیل تعریف می‌گردند. در ارتباط با شبیه‌سازی ماشین‌کاری نانومتری سیلیکون، محققین تاکنون از توابع پتانسیل مختلفی استفاده نموده‌اند. جای و همکارانش [4] در سال ۲۰۰۷ از تابع پتانسیل ترسوف جهت مطالعه مکانیزم ماشین‌کاری نرم قطعه‌کار سیلیکونی استفاده نمودند. گوئل و همکارانش [5] به منظور بررسی تغییرات ساختار قطعه‌کار SiC در حین ماشین‌کاری نانومتری، از تابع پتانسیل ترسوف استفاده نمودند. بدین صورت آن‌ها چگونگی تولید فاز گرافنی شکل را که سبب برش نرم این ماده می‌شد نشان دادند. ژو و همکارانش [6] با استفاده از تابع پتانسیل ترسوف، تحول فازی قطعه‌کار سیلیکونی را در حین ماشین‌کاری مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها همچنین از همین تابع پتانسیل جهت تعریف اندرکنش اتم‌های ابزار و قطعه‌کار استفاده نمودند. لو و همکارانش [7] با استفاده از تابع پتانسیل ترسوف بین اتم‌های قطعه‌کار سیلیکونی و Si-C، آسیب‌های زیرسطحی حاصل از ماشین‌کاری نانومتری را بررسی نمودند. هه و همکارانش [8] از ترکیب تابع پتانسیل ترسوف و مورس جهت تعریف اندرکنش‌های Si-Si و Si-C در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند سنگزنی نانومتری استفاده نمودند. علاوه بر تابع پتانسیل ترسوف، تابع پتانسیل استیلینگر-وبر نیز در سال‌های اخیر مورد توجه محققین قرار گرفته است. بطور مثال زارع چاوشی و همکارانش [9] در سال ۲۰۱۶ با استفاده از این تابع پتانسیل به مطالعهٔ مکانیزم‌های نابجایی در کریستال پلاستیسیته پرداختند.

مقایسهٔ توابع پتانسیل مختلف و بررسی تأثیر آن‌ها

بر نتایج مسئله، موضوعی است که تنها توسط تعداد کمی از محققین مورد بررسی قرار گرفته است. برخی از تحقیقات به بررسی تأثیر تابع پتانسیل در فرآیندهای شبیه‌سازی آب [10]، پلاسما [11] و بمباران خوشه‌ای [12] پرداخته‌اند. رنچ و ایناساکی [13] در تحقیقی که در مورد شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیندهای سایشی انجام داده بودند، اعلام کردند در صورتی‌که هدف فقط کاهش هزینه محاسباتی در حل معادلات شرودینگر باشد، می‌توان از توابع پتانسیل جفتی (pair potentials) استفاده کرد. با این حال، آن‌ها اظهارنظری در مورد دقت این توابع پتانسیل نکردند. لی و همکارانش [14] به شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند لیسه‌کاری (Lapping) پرداختند. آن‌ها اگرچه به اهمیت اندرکنش اتم‌ها در این شبیه‌سازی تاکید داشتند، اما فقط از تابع پتانسیل ترسوف در تحقیقات خود استفاده نمودند. آن‌ها دلیل این موضوع را توانایی بالای این تابع پتانسیل در تعریف پیوندهای کووالانسی اعلام کردند.

این تحقیقات در زمینه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ماشین‌کاری نانومتری نیز اندک می‌باشد. حسینی و همکارانش [15] در سال ۲۰۱۱ به بررسی تأثیر تابع پتانسیل مورس و EAM بر ماشین‌کاری قطعه‌کار مسی پرداختند. آن‌ها نشان دادند که تابع پتانسیل EAM (Embedded Atom Model) از توانایی بهتری جهت پیشبینی تغییر شکل پلاستیک برخوردار می‌باشد. اولووجوبی و چن [16] به مقایسه تأثیر سه نوع تابع پتانسیل لنارد-جونز، مورس و EAM بر نتایج ماشین‌کاری نانومتری قطعه‌کار مسی پرداختند. آن‌ها دریافتند که تابع پتانسیل EAM به‌علت توصیف بهتر اتصالات فلزی، بهترین نتیجه را ارائه می‌دهد. این محققین در تحقیقات دیگر خود تأثیر این توابع پتانسیل را بر نیروی ماشین‌کاری، شکل براده و انرژی پتانسیل بررسی نمودند [17,18]. زارع چاوشی و همکارانش [19] از دو تابع پتانسیل ترسوف و ABOP (Analytic bond-order potentials) جهت شبیه‌سازی دما بالای ماشین‌کاری نانومتری قطعه‌کار SiC استفاده نمودند. آنها همچنین با بررسی مکانیزم براده‌برداری دریافتند که تابع پتانسیل ABOP، دمای ذوب و ناپایداری بیشتری را نسبت به مقدار واقعی ارائه می‌دهد [20]. در تحقیقی که اخیراً توسط ژانگ و اورباسک [21] در سال ۲۰۱۷ انجام پذیرفت، از سه تابع پتانسیل استیلینگر-وبر، ترسوف و یک تابع پتانسیل جدید جهت توصیف رفتار پلاستیسیته و استحاله‌های فازی قطعه سیلیکونی استفاده شده است. آنها نشان دادند که تابع پتانسیل استیلینگر-وبر بهترین نتیجه را در توصیف رفتار تغییر شکل پلاستیک دارد. حال آنکه جهت بررسی تحولات فازی، بهتر است از تابع پتانسیل ترسوف استفاده گردد.

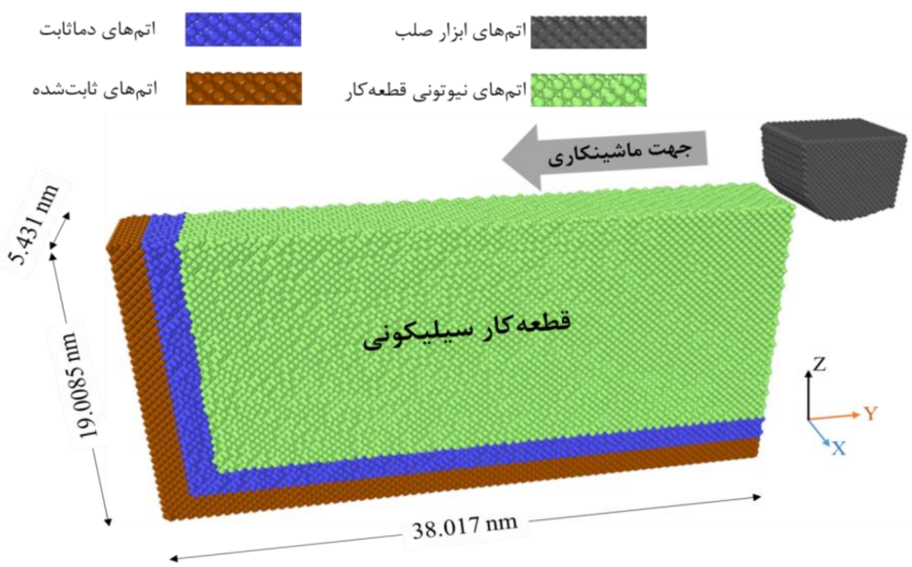
تاکنون تحقیق جامعی که بطور خاص و جامع بر روی تأثیر توابع پتانسیل مختلف بر روند ماشین‌کاری نانومتری قطعه‌کار سیلیکونی مطالعه نماید انجام نپذیرفته است. در این تحقیق به بررسی تأثیر توابع پتانسیل ترسوف، استیلینگر-وبر و مورس بر نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی این فرآیند پرداخته شده است. به‌این‌منظور، شرایط دیگر مسئله از جمله ابعاد قطعه‌کار، هندسه ابزار و شرایط ماشین‌کاری، در تمامی شبیه‌سازی‌ها یکسان در نظر گرفته شده است. بررسی تأثیر این پارامتر بر مکانیزم براده‌برداری، دمای قطعه‌کار، نیروهای ماشین‌کاری و انرژی سیستم، مواردی می‌باشند که مورد بررسی قرار گرفته‌اند.

روند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

هندسه مسئله و شرایط ماشین‌کاری. شماتیک مدل سه‌بعدی از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند ماشین‌کاری نانومتری در شکل (۱) نشان داده شده است. قطعه‌کار مورد استفاده در این تحقیق از جنس سیلیکون تک‌کریستال با دمای اولیه ۲۹۳ درجه کلوین

می‌باشد. سه ناحیهٔ اتمی نیوتونی، دماثابت و ثابت‌شده در این قطعه‌کار تعریف شده‌اند. ناحیه اول، سه لایه‌ی اتمی ثابت (fixed) در کف و سمت چپ قطعه‌کار می‌باشد (اتم‌های قهوه‌ای رنگ). هدف از تعریف این اتم‌ها جلوگیری از حرکت قطعه‌کار در حین فرآیند ماشین‌کاری می‌باشد(اتم‌های آبی رنگ). سه لایه اتمی بعدی که در بالای این اتم‌ها قرار گرفته‌اند، اتم‌های دماثابت (thermostat) هستند. این اتم‌ها نقش انتقال حرارت حاصل از براده‌ها و خنک‌کننده‌ها را ایفا می‌کنند. دمای این ناحیه، با استفاده از روش مقیاس‌دهی (scaling) سرعت اتم‌ها در هر ۱۰ گام زمانی یکبار، برابر با ۲۹۳ درجه کلوین (برابر با دمای اولیه قطعه‌کار) نگاه داشته شده است. مابقی اتم‌های قطعه‌کار که با رنگ سبز نشان داده شده‌اند، اتم‌های نیوتونی بوده و با توجه به حرکت ابزار و شرایط مسئله، مطابق با قوانین دینامیک نیوتونی رفتار خواهند کرد. این قسمت، ناحیه اصلی مورد بررسی در حین فرآیند ماشین‌کاری می‌باشد. رفتار اتم‌های این ناحیه مطابق با هنگرد کانونی کوچک (NVE) تعیین گردیده است. قطعه‌کار تک‌کریستال سیلیکونی مورد مطالعه در این تحقیق دارای ساختار کریستالی الماس مکعبی (cubic diamond) با ثابت شبکه ۵.۴۳۱Å می‌باشد [22]. این قطعه‌کار به‌صورت ایده‌آل با صفحه کریستالی (۰۰۱) تعریف گردیده و راستای ماشین‌کاری در جهت [۰۱۰] اعمال شده است.

ابزار نقشی اساسی در تعیین نیروهای ماشین‌کاری و صافی سطح نهایی ایفا می‌کند. در عمل، از الماس تک‌کریستال به‌عنوان ابزار برشی استفاده می‌شود. با این حال، با توجه به سایش بسیار اندک این ماده در حین فرآیند ماشین‌کاری، معمولاً در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی، ابزار برشی را به‌صورت صلب در نظر می‌گیرند [23-25]. در تحقیقات پیش رو نیز از همین رویکرد استفاده شده است. با این حال، شبکه کریستالی و دیگر خواص اتمی ابزار دقیقاً مطابق با ابزارهای الماس طبیعی تعریف شده است. جدول (۱) هندسه مسئله مورد مطالعه در این پژوهش را نشان می‌دهد. ابعاد قطعه‌کار و پارامترهای شبیه‌سازی بر مبنای پیشینه پژوهش و تحقیق دیگری که توسط نویسندگان این مقاله انجام پذیرفته، انتخاب شده است [۲۶].



شکل ۱ شماتیک قطعه‌کار و ابزار مورد استفاده در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند ماشین‌کاری نانومتری.

جدول ۱ مشخصات مدل دینامیک مولکولی مورد مطالعه.

مشخصات قطعه‌کار			
ابعاد قطعه‌کار	38.017 (length) × 19.0085(height) ×5.431(width) nm^3		
نسبت طول به عمق قطعه‌کار	2		
دمای اولیه قطعه‌کار	293K		
تعداد کل اتم‌های قطعه‌کار	198110		
تعداد اتم‌های شرط مرزی	26590		
تعداد اتم‌های دما ثابت	25030		
مشخصات ابزار برشی		شرایط ماشین‌کاری	
جنس ابزار	الماس	عمق ماشین‌کاری	1.05nm
شعاع لبه ابزار	3nm	سرعت برش	100 m/s
زاویه پیشانی ابزار	-10	نسبت عمق ماشین‌کاری به شعاع لبه ابزار	0.35
زاویه آزاد ابزار	15		
تعداد اتم‌های ابزار	27839	طول ماشین‌کاری	30 nm

جدول ۲ توابع پتانسیل مورد استفاده جهت تعریف اندرکنش بین ذرات مختلف در سیستم.

	ابزار- قطعه‌کار	قطعه‌کار
تابع پتانسیل (حالت ۱)	مورس	ترسوف
تابع پتانسیل (حالت ۲)	ترسوف	ترسوف
تابع پتانسیل (حالت ۳)	مورس	استیلینگر-وبر

اندرکنش بین اتمی. می‌توان به جرأت بیان داشت که مهم‌ترین عامل در تعیین نتایج یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، نحوه تعریف اندرکنش ذرات آن سیستم می‌باشد [2]. در فیزیک، از توابع پتانسیل تحلیلی (analytical potential) جهت تعریف این اندرکنش‌ها استفاده می‌شود. در این پژوهش از ترکیب سه تابع پتانسیل مورس، ترسوف و استیلینگر-وبر جهت انجام شبیه‌سازی‌ها استفاده شده و رفتار سیستم در هر یک از این شرایط بررسی گردیده است. جدول (۲) تابع پتانسیل مورد استفاده در هر سری از این شبیه‌سازی‌ها را نشان می‌دهد.

تابع پتانسیل مورس، از جمله توابع پتانسیل جفتی مرسوم جهت اعمال برهم‌کنش‌های پیوندی (bonded interaction) می‌باشد [11]. این تابع پتانسیل توانایی پیاده‌سازی نیروهای دافعه در برد کوتاه و نیروهای جاذبه را در برد متوسط داشته و در فواصل دورتر اتمی نیز به آرامی به صفر میل می‌کند. مطابق رابطهٔ (۱)، این تابع پتانسیل از دو قسمت نمایی تشکیل شده است:

$$U\left(r_{ij}\right)=E_0\left\{e^{-2\propto\left(r_{ij}-r_0\right)}-2e^{-\propto\left(r_{ij}-r_0\right)}\right\} \qquad (۱)$$

که در آن r_0 و r_{ij} به ترتیب عبارت است از فاصله تعادلی و فاصله لحظه‌ای بین اتم i و j. همچنین E_0 و $\propto$ مدول الاستیسیته و انرژی پیوستگی می‌باشند که بر مبنای خواص فیزیکی ماده ارائه گردیده‌اند.

مرسوم‌ترین تابع پتانسیل مورد استفاده در تعریف

اندرکنش اتم‌های سیلیکون، تابع پتانسیل ترسوف می‌باشد؛ که یک تابع پتانسیل چندجزئی است. این تابع پتانسیل در دهه ۹۰ میلادی شهرت زیادی در زمینه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به دست آورد. با این حال، این تابع پتانسیل دارای نقاط ضعفی مانند توصیف ضعیف تحول گرافیت به الماس و همچنین شکست مواد ترد می‌باشد [27]. همچنین این تابع پتانسیل از توانایی کافی در پیش‌بینی رفتار سیستم در دماهای بالا برخوردار نیست [19]. ترسوف انرژی کل سیستم را به‌صورت مجموعه‌ای از برهم‌کنش‌های جفتی و بر مبنای مختصات اتمی، به‌صورت رابطهٔ زیر مدل‌سازی کرد [28].

$$E=\sum_i E_i=\frac{1}{2}\sum_i\sum_{j\neq i}U(r_{ij}) \qquad (۲)$$

مبنای این تابع پتانسیل، ثابت نبودن استحکام پیوندی بین دو اتم و وابستگی آن به شرایط محیطی می‌باشد. این تابع پتانسیل مطابق رابطهٔ (۳) می‌باشد.

$$U(r_{ij})=f_c(r_{ij})\left[a_{ij}f_R(r_{ij})+b_{ij}f_A(r_{ij})\right] \qquad (۳)$$

که در آن:

$$f_R(r)=A\,exp(-\lambda_1 r),\ f_A(r)=-B\,exp(-\lambda_2 r)$$

$$f_c(r)=\begin{cases}1 & r<R-D\\ \frac{1}{2}-\frac{1}{2}sin\left[\frac{\frac{\pi}{2}(r-R)}{D}\right] & R-D<r<R+D\\ 0 & r>R+D\end{cases}$$

$$b_{ij}=\left(1+\beta^n\zeta_{ij}^n\right)^{-1/2n}$$

$$\zeta_{ij}^n=\sum_{k(\neq i,j)}f_c(r_{ik})\,g(\theta_{ijk})\,exp\left[\lambda_3^3(r_{ij}-r_{ik})^3\right].$$

$$g(\theta)=1+\frac{p^2}{q^2}-\frac{p^2}{[q^2+(h-cos\theta)^2]}$$

$$a_{ij}=\left(1+\alpha^n\eta_{ij}^n\right)^{-1/2n}$$

$$\eta_{ij}=\sum_{k(\neq i,j)}f_c(r_{ik})\,exp\left[\lambda_3^3(r_{ij}-r_{ik})^3\right]$$

در رابطهٔ فوق، هر یک از مؤلفه‌های i، j و k نشان‌دهنده یکی از اتم‌هایی می‌باشند که در این رابطه مورد توجه قرار گرفته‌اند. علاوه بر این، r_{ij} بیانگر فاصله اتمی و θ_{ijk} زاویه پیوندی بین سه اتم می‌باشد. λ_1، λ_2 و λ_3 نیز ضرایب اصلاح‌کننده‌ای می‌باشند که جهت وارد کردن تأثیر پیوندهای والانس و هندسه سیستم وارد معادله گردیده‌اند. f_R و f_A نیز به ترتیب قسمت‌های دافعه و جاذبه می‌باشند. یکی از حسن‌های تابع پتانسیل ترسوف، در نظر گرفتن زاویه پیوندی می‌باشد.

تابع پتانسیل استیلینگر- وبر نیز تابعی چند جزئی می‌باشد که توسط دو دانشمند با همین نام در سال ۱۹۸۵ معرفی گردید. در این تابع پتانسیل، ماهیت چند جزئی نیروها با مجموعه‌ای ساده از اندرکنش‌های دوجزئی (U_2) و سه‌جزئی (U_3) تعریف شده‌اند [29, 30]:

$$U=V_2+V_3=\epsilon A\left[\sum_{ij}v_{ij}^{(2)}(r_{ij})+\frac{\lambda}{A}\sum_{jik}v_{jik}^{(3)}(\bar{r}_{ij}.\bar{r}_{ik})\right] \qquad (٤)$$

این تابع توانایی مناسبی در توصیف رفتار الاستیک و خواص حرارتی بسیاری از مواد کووالانت (از جمله سیلیکون) را دارا می‌باشد [31,32]. مشخصهٔ دیگر این تابع پتانسیل، توانایی تعریف تبدیل فازی در دمای نزدیک به ذوب می‌باشد [33].

شرایط مدل‌سازی دینامیک مولکولی. انتخاب شرایط مناسب و نحوه اعمال صحیح آن‌ها، علاوه بر دانش گسترده دینامیک مولکولی، نیازمند تسلط عمیق بر نرم‌افزار شبیه‌سازی و همچنین مبانی ریاضی و فیزیک می‌باشد. یکی از این نکات مهم، تعریف صحیح شرایط مرزی مسئله می‌باشد. در این شبیه‌سازی‌ها، شرایط مرزی قطعه‌کار در راستای X به‌صورت متناوب و در دو سطح جلویی و فوقانی قطعه‌کار (صفحات XY و XZ) نیز به‌صورت غیرتناوبی و سطوح آزاد تعریف

گردیده‌اند. این سطوح دارای هیچ محدودیتی نبوده و به‌طور کامل می‌توانند مکانیزم براده‌برداری و صافی سطح را نشان بدهند. همچنین از روش انتگرال‌گیری ورله سرعتی (velocity Verlet algorithm) با گام زمانی 1fs جهت تخمین موقعیت، سرعت و شتاب ذرات و سپس محاسبه خواص ترمودینامیکی استفاده شده است.

علیرغم تعریف اتم‌های قطعه‌کار تحت شرایط واقعی، قطعات تحت دو مرحله کمینه‌سازی و یک مرحله تعادل‌رسانی قرار گرفتند. این کار به‌منظور جای‌نشینی کاملاً ایده‌آل ذرات تحت شرایط مسئله بوده است. بدین منظور در مرحله اول، پس از تعریف قطعه‌کار و ابزار، الگوریتم کمینه‌سازی اعمال گردید. سپس ابزار تا عمق ماشین‌کاری مورد نظر حرکت کرده و دومین گام کمینه‌سازی نیز پیاده شد. در ادامه، دمای قطعه‌کار برابر با ۲۹۳ درجه کلوین تعریف شده و کل سیستم به مدت ۲۵ پیکوثانیه و بدون هیچگونه حرکتی در ابزار، به حال خود رها شد تا تعادل نهایی حاصل گردد.

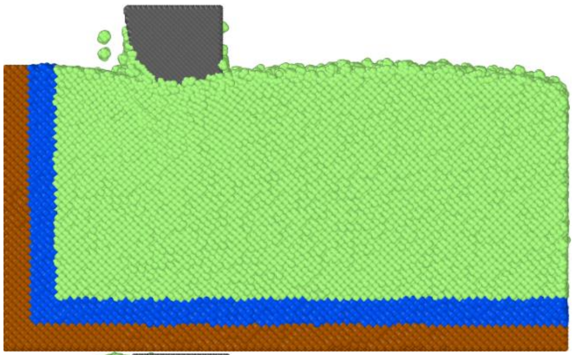
در این تحقیق از نرم‌افزار لمپس (LAMMPS) جهت شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند ماشین‌کاری نانومتری استفاده شده است [34]. همچنین جهت مشاهده مختصات اتم‌ها و مکانیزم ماشین‌کاری از نرم‌افزار منبع باز اوویتو (OVITO) بهره برده شده است [35]. این شبیه‌سازی‌ها با استفاده از سیستم سخت‌افزاری توان-بالای دانشگاه کِیو (Keio) ژاپن با ۴۸ هسته انجام پذیرفت و میانگین زمان هر تحلیل در حدود ۲٤ ساعت بود.

نتایج و بحث

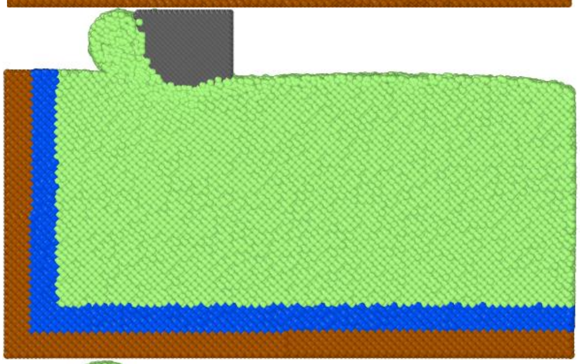
تأثیر تابع پتانسیل بر مکانیزم براده‌برداری. شکل (۲) تغییر شکل اتمی و هندسه براده تولیدشده در قطعه سیلیکونی تک‌کریستال را با سه نوع ترکیب تابع پتانسیل نشان می‌دهد. این شکل نشان می‌دهد که چگونه کوچکترین تغییری در تابع پتانسیل بین اتم‌ها، منجر به تغییر شکل براده‌ها می‌گردد.

مطابق شکل (۲-الف و ب)، مشاهده می‌گردد که پیشروی ابزار، سبب ایجاد اعوجاج در قسمت اتم‌های سطحی قطعه‌کار گردیده است. دلیل این موضوع، ویژگی تابع پتانسیل ترسوف در توصیف خواص الاستیک قطعات می‌باشد. با این حال، هنگامیکه از تابع پتانسیل مورس برای توصیف اندرکنش اتمهای ابزار و قطعه‌کار استفاده شده است (شکل۲-الف)، ماشین‌کاری کاملاً به صورت ترد در آمده و براده‌های منقطع تولید شده‌اند. در این شرایط کیفیت سطح ماشین‌کاری شده نیز کاهش یافته است. این موضوع به‌دلیل حذف اثرات چندجزئی نیروهای بین اتمی در ابزار و قطعه‌کار می‌باشد. با این حال، باتوجه به توانایی بالاتر تابع پتانسیل ترسوف در توصیف خواص سطحی، به‌نظر می‌رسد که صافی سطح حاصل از شرایط ترسوف-ترسوف از صحت بالاتری برخوردار باشد (شکل ۲-ب) [28]. مطابق شکل (۲-پ)، ماشین‌کاری قطعه‌کار سیلیکونی با استفاده از تابع پتانسیل استیلینگر-وبر، آشفتگی اتمی کمتر و صافی سطح بهتری را نشان می‌دهد. دلیل این موضوع را می‌توان در دو موضوع یافت. نخست آن‌که این تابع پتانسیل نقطه تسلیم بالاتری را نسبت به تابع پتانسیل ترسوف ارائه می‌دهد [12]؛ که در این صورت اتمها مقاومت بیشتری را برای جابه‌جایی از خود نشان خواهند داد. از طرف دیگر با پیشروی ابزار و افزایش دمای قطعه‌کار، تابع پتانسیل استیلینگر-وبر مجموعه‌ای از تحولات فازی را در درون قطعه‌کار تعریف می‌کند که این می‌تواند بر حرکت اتمها تأثیر مستقیم بگذارد.

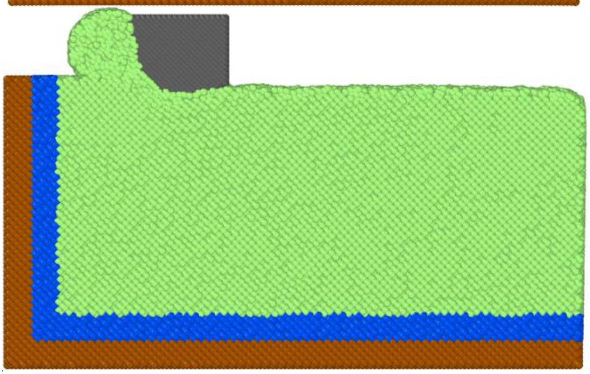
تأثیر تابع پتانسیل بر دما. شکل (۳) نمودار تغییر دمای قطعه‌کار را با پیشروی ابزار در سه ترکیب تابع پتانسیل مختلف نشان می‌دهد. مطابق این شکل، روند تغییرات دما در تمامی حالت‌ها به‌صورت افزایشی می‌باشد. دلیل این موضوع، وجود اصطکاک، افزایش انرژی جنبشی و همچنین ورود حرارت ناشی از ماشین‌کاری به درون قطعه‌کار است.



(الف)

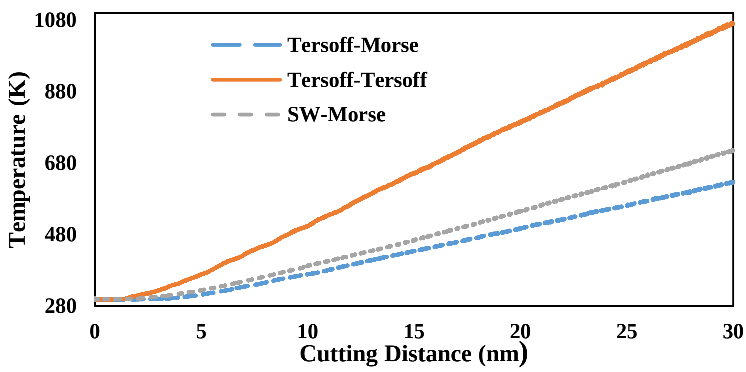


(ب)



(پ)

شکل ۲ تغییر شکل اتمی قطعه‌کار پس از ۳۰ نانومتر پیشروی ابزار با استفاده از توابع پتانسیل مختلف:
الف- مورس (ابزار-قطعه‌کار) و ترسوف (قطعه کار)، ب- ترسوف (ابزار-قطعه‌کار) و ترسوف (قطعه‌کار)،
پ- مورس (ابزار-قطعه‌کار) و استیلینگر-وبر (قطعه‌کار).



شکل ۳ تغییرات دمای قطعه‌کار با پیشروی ابزار تحت توابع پتانسیل مختلف.

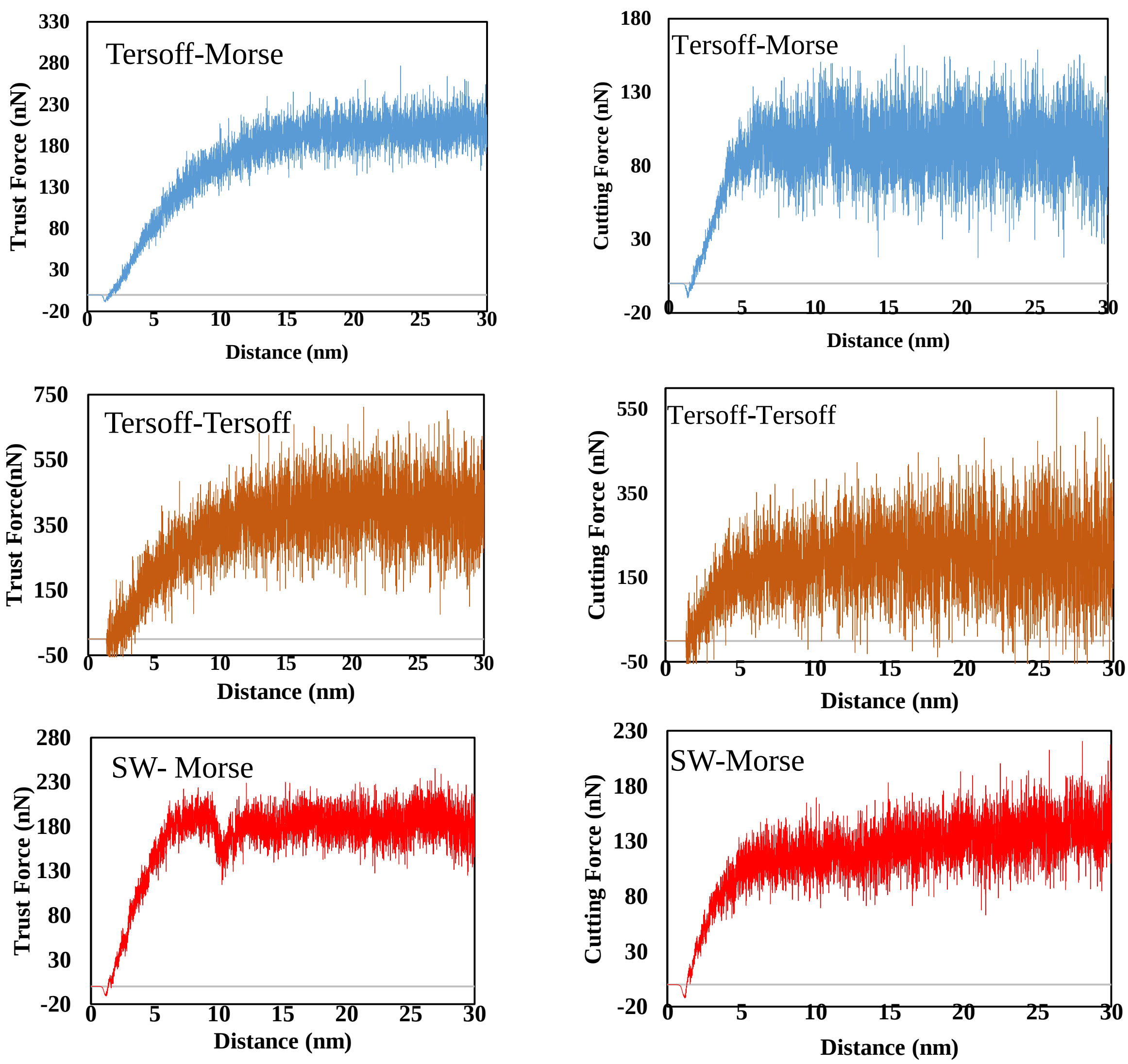
لیکن مشاهده می‌گردد تابع پتانسیلی که انـدرکنش بـین اتم‌های ابزار و قطعه را تعریف می‌کند، تأثیر بیشتری بر نمودار دمایی قطعه‌کار دارد؛ به‌طوری‌که بـا ثابـت نگـاه داشتن اندرکنش مورس بـین اتـم‌هـای ابـزار المـاس و قطعه‌کار سیلیکونی و تغییر اندرکنش اتم‌های قطعـه‌کـار از ترسوف به استیلینگر-وبر، فقط تغییر اندکی در روند افـزایش دمـای قطعـه‌کـار رخ داده اسـت. دلیـل ایـن موضوع، وجود قسمت‌های دوجزئی و سه‌جزئی در هر دو تابع پتانسیل ترسوف و استیلینگر-وبر می‌باشد.

این بدان معنا است کـه در هـر دو شـرایط، تقریبـاً اندرکنش‌های یکسانی بین اتم‌ها پیـاده شـده اسـت. در بین این دو حالت، دمای قطعه‌کار تحـت تـابع پتانسـیل استیلینگر-وبر در نهایت حدود ۵٫۸ ٪ بیشـتر از حالـت دیگر بوده است. دلیل این موضوع را می‌توان در رفتـار تغییر شکل الاستیک قطعه‌کار جست. مطابق شکل (۲)، قطعه‌کار تحت تابع پتانسـیل اسـتیلینگر-وبـر، تغییـرات الاستیک کمتری را تجربه کرده اسـت و بیشـتر انـرژی ماشین‌کاری صرف براده‌برداری و در نتیجه افزایش دمـا گردیده است.

از طرف دیگر، مشاهده می‌گردد که تغییر اندرکنش اتم‌های ابزار و قطعه‌کار از مورس بـه ترسـوف، سـبب افزایش محسوس دما گردیده است. به‌طوری‌کـه دمـای نهایی قطعه‌کار نسبت به دو حالت دیگر به طور متوسط ۲۸٫۳ ٪ بیشتر شده است. دلیل این موضـوع در ماهیـت چند جزئی تابع پتانسیل ترسوف می‌باشـد. تحـت ایـن شرایط، اتم‌های بیشتری در تعریف اندرکنش اتـم‌هـای ابزار و قطعه‌کـار دخیـل گردیـده و شـرایط بـه حالـت واقعی‌تر نزدیک می‌شود. لیکن می‌توان گفت که استفاده از تابع پتانسیل ترسوف جهت تعریف اندرکنش تمـامی اتم‌های این سیستم، می‌تواند مناسب‌ترین گزینه در بین موارد بررسی شده باشد.

تأثیر تابع پتانسیل بر نیروهای ماشـین‌کـاری. تـأثیر توابع پتانسیل مختلف بـر نیروهـای برشـی و عمـودی ماشین‌کاری قطعه‌کار سیلیکونی درشکل (٤) آورده شده است. مطابق آنچه در تغییرات دمایی قطعه‌کـار رخ داد، در این قسمت نیز مشاهده می‌گردد در شـرایطی کـه از تابع پتانسیل مورس جهت توصیف اندرکنش اتـم‌هـای سـیلیکون و کـربن اسـتفاده گـردد، تغییـرات نیـروی ماشین‌کاری به یکدیگر نزدیک خواهند بود. با این حال اعمـال تـابع پتانسـیل ترسـوف بـین اتـم‌هـای ابـزار و قطعه‌کار، سبب افزایش میانگین نیروها تا حدود ۳۲٫۱ ٪ می‌گردد. این موضوع کاملاً با حجم براده تولید شـده و تغییرات دمایی قطعه‌کـار همخـوانی دارد. زیـرا نیـروی بیشتر در قطعه‌کـار، سـبب افـزایش حجـم بـراده و در نتیجه افزایش دمای قطعه‌کار می‌گردد.

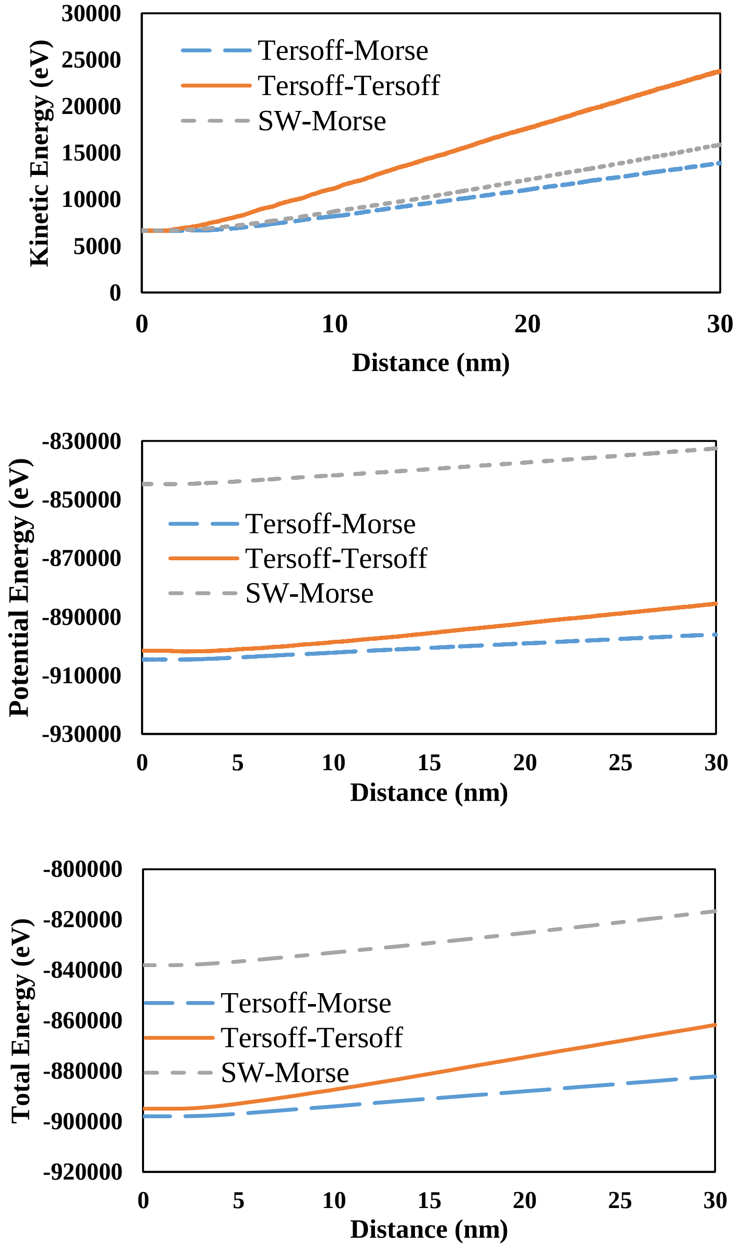
نکته قابل توجه دیگر از این نتـایج، میـزان نیـروی اولیـه ماشـین‌کـاری مـی‌باشـد. مطـابق ایـن شـکل، در صورتیکه از تابع پتانسیل مورس برای تعریف اندرکنش اتم‌های بین قطعه‌کار و ابزار اسـتفاده گـردد، در ابتـدای ماشین‌کاری مقداری نیروی منفی بوجود خواهـد آمـد؛ که این با ماهیت فیزیکی مسئله در تنـاقض اسـت. ایـن موضـوع بـه دلیـل ویژگـی تـابع پتانسـیل مـورس در پیاده‌سازی نیروهای جاذبـه در بـرد متوسـط مـی‌باشـد. یعنی پیش از برخورد اتم‌های ابزار بـا قطعـه‌کـار، ایـن اتم‌ها بر روی یکدیگر نیروی جاذبه وارد کرده و سـبب ایجاد نیروی ماشین‌کاری منفی می‌گردند.



(ب)   (الف)

شکل ٤ تأثیر تابع پتانسیل بر الف– تغییرات نیروی برشی، ب– تغییرات نیروی عمودی.

تأثیر تابع پتانسیل بر انرژی ماشین‌کاری. شکل (٥) تأثیر توابع پتانسیل مختلف را بر انرژی‌های جنبشی، پتانسیل و کل سیستم نشان می‌دهد. مطابق شکل (٥–الف)، بدون در نظر گرفتن نوع تابع پتانسیل، انرژی جنبشی سیستم با پیشروی ابزار در درون قطعه‌کار افزایش می‌یابد. انرژی جنبشی سیستم به طور مستقیم با سرعت حرکت ذرات ارتباط دارد. دقیقاً به همین دلیل هنگامیکه با پیشروی ابزار اتم‌های بیشتری جابه‌جا می‌گردد، سطح انرژی جنبشی سیستم نیز افزایش می‌یابد. بیشترین افزایش انرژی جنبشی برابر با ٧٦٫٧ ٪ و مربوط به اندرکنش ترسوف بین اتم‌های سیلیکون و کربن–سیلیکون می‌باشد. این موضوع دلیل افزایش دمای قطعه‌کار را تحت این شرایط توجیه می‌کند (شکل ٣)؛ زیرا دما نمودی کمّی از میزان انرژی جنبشی سیستم می‌باشد. همچنین مشاهده می‌گردد در شرایطی که از تابع پتانسیل مورس جهت تعریف اندرکنش اتم‌های کربن و سیلیکون استفاده شده است، شیب تغییرات انرژی جنبشی بسیار نزدیک و تقریباً یکسان می‌باشد.



(الف)

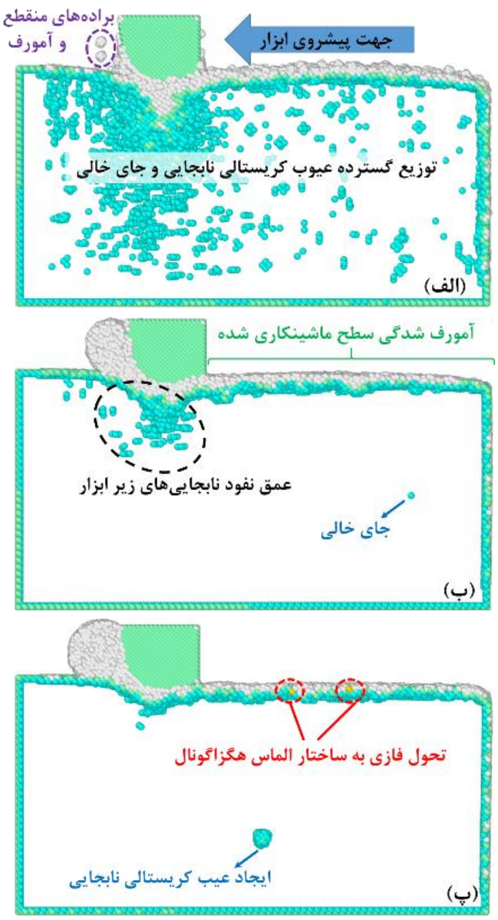
(ب)

(پ)

شکل ۵ تأثیر تابع پتانسیل بر الف- انرژی جنبشی، ب- انرژی پتانسیل، پ- انرژی کل سیستم.

می‌توان دلیل این موضوع را اهمیت بیشتر اندرکنش اتم‌های ابزار با قطعه‌کار نسبت به اتم‌های درونی قطعه‌کار دانست. همچنین مطابق شکل (۵-ب و پ) مشاهده می‌گردد که انرژی پتانسیل و انرژی کل سیستم همواره در حال افزایش است. دلیل این موضوع، وارد آمدن نیروی خارج از سیستم می‌باشد که سبب رانش ابزار در درون قطعه‌کار می‌گردد. طبق شکل (۵-ب)، مشاهده می‌گردد که اندرکنش اتم‌های سیلیکون نقش اصلی را در تعیین میزان انرژی پتانسیل سیستم ایفا می‌کنند. به‌طوری‌که با در نظر گرفتن تابع پتانسیل ترسوف برای این بخش و تغییر تابع پتانسیل بین ابزار و قطعه‌کار، تغییر محسوسی مشاهده نمی‌گردد.

تأثیر تابع پتانسیل بر آسیب‌های زیرسطحی. شکل (٦) توزیع آسیب‌های زیرسطحی قطعه‌کار تک‌کریستال سیلیکونی را تحت سه ترکیب مختلف اندرکنش اتمی نشان می‌دهد. این کار با استفاده از تحلیل همسایگی مرسوم (Common Neighbor Analysis) صورت پذیرفته است [41]. به دلیل اینکه بتوان دید بهتری به توزیع عیوب و تغییرات فازی درون قطعه‌کار داشت، اتم‌های قطعه‌کار با ساختار الماسی (Si-I) حذف گردیده‌اند. در این شکل، اتم‌های سفیدرنگ نشان‌دهندهٔ ساختار آمورف می‌باشند. همچنین اتم‌های آبی و سبز بیانگر ساختار الماس همسایگی اول و دوم هستند. وجود این اتم‌ها در دیوارهٔ قطعه‌کار و مرز ذرات آمورف، نشان‌دهنده محدوده ساختار کریستالی قطعه‌کار (با پیوندهای معلق) و در درون قطعه‌کار نشان‌دهنده تشکیل نابجایی می‌باشد [42]. نتایج شبیه‌سازی نشان‌دهندهٔ وجود یک لایه آمورف در سطح ماشین‌کاری شده می‌باشد. همچنین مشاهده می‌گردد که در تمامی موارد، برادهٔ ایجاد شده کاملاً به‌صورت آمورف درآمده است. مطابق شکل (٦ –الف)، در استفاده از ترکیب تابع پتانسیل ترسوف-مورس، حجم بسیار زیادی از انواع عیوب نابجایی و جای خالی در قطعه‌کار دیده می‌شود. دلیل اصلی این موضوع دور برد بودن تابع پتانسیل مورس می‌باشد که اثرات خود را بر لایه‌های زیرین قطعه‌کار نشان می‌دهد. علیرغم استفادهٔ فراوان محققین از ترکیب تابع پتانسیل ترسوف-مورس، وجود این حجم از عیوب کریستالی دور از انتظار بوده و اینطور به نظر می‌رسد که استفاده از این ترکیب چندان مناسب نمی‌باشد. با تغییر اندرکنش ابزار-قطعه‌کار به ترسوف، مشاهده می‌گردد که مقدار نابجایی‌ها کاهش یافته و فقط در قسمت زیرین ابزار متمرکز شده‌اند (شکل ٦–ب). منشأ این نابه‌جایی‌ها فشار هیدرواستاتیک ابزار به درون قطعه‌کار می‌باشد. مطابق شکل (٦ –پ)، در حالتی‌که از ترکیب تابع پتانسیل استیلینگر-وبر و مورس استفاده شده است، تعدادی تحول فازی به حالت الماس هگزاگونال در سطح ماشین‌کاری‌شده دیده می‌شود. از آنجایی‌که حجم برادهٔ حاصل از این حالت بیشتر از موارد دیگر می‌باشد، می‌توان نتیجه گرفت که مقدار فشار هیدرواستاتیک بیشتری نیز به سطح قطعه‌کار وارد گردیده که این سبب تحول فازی تعدادی از اتم‌های سطحی شده است. از آنجاییکه تابع پتانسیل استیلینگر-وبر توانایی بیشتری در پیاده‌سازی خواص الاستیک قطعه‌کار دارد، مشاهده می‌گردد که مقدار عیوب زیرسطحی در این حالت به‌شدت کاهش یافته و فقط یک عیب نابجایی در درون قطعه‌کار دیده می‌شود.



شکل ٦ شکل‌گیری و توزیع آسیب‌های زیرسطحی قطعه‌کار تک‌کریستال سیلیکونی تحت تابع پتانسیل
الف- ترسوف-مورس، ب- ترسوف-ترسوف،
و پ- استیلینگر وبر- مورس.

نتیجه‌گیری

در این مقاله از ترکیب سه نوع تابع پتانسیل مورس، ترسوف و استیلینگر-وبر جهت شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ماشین‌کاری نانومتری استفاده گردید. مهم‌ترین یافته‌های این تحقیق به شرح ذیل می‌باشد:

- استفاده از تابع پتانسیل دوجزئی مورس جهت تعریف اندرکنش اتم‌های ابزار و قطعه‌کار، سبب ایجاد برش ترد و براده‌های منقطع می‌گردد.
- تابع پتانسیل استیلینگر-وبر بهترین صافی سطح و کمترین اعوجاج لبه را در ماشین‌کاری نانومتری سیلیکون ارائه می‌دهد. استفاده از تابع پتانسیل ترسوف جهت تعریف اندرکنش اتم‌های ابزار و قطعه‌کار باعث افزایش میانگین نیروی ماشین‌کاری به اندازهٔ ۳۲٫۱ ٪ می‌گردد. همچنین این تابع پتانسیل، سبب افزایش ۲٦ درصدی نوسانات نیروی ماشین‌کاری نسبت به تابع پتانسیل مورس شده است.
- اندرکنش بین اتم‌های ابزار و قطعه‌کار، تأثیر بسیار بیشتری بر روی نیروی ماشین‌کاری، انرژی جنبشی و دمای قطعه‌کار دارد. در مقابل، اندرکنشی اتم‌های درون قطعه‌کار، نقش اصلی را در تعیین انرژی پتانسیل و انرژی کل سیستم ایفا می‌کنند.
- به‌طور میانگین حدود ۹۸٫۸٤ ٪ از انرژی کل سیستم مربوط به انرژی پتانسیل می‌باشد. لذا تابع پتانسیلی که جهت تعریف اندرکنش اتم‌های درونی قطعه‌کار مورد استفاده قرار می‌گیرد، تأثیر بسیار بیشتری بر این مقدار خواهد داشت.
- استفاده از تابع پتانسیل ترسوف جهت تعریف اندرکنش اتم‌های قطعه‌کار سیلیکونی با یکدیگر و همچنین با ابزار الماس، نزدیک‌ترین نتیجه را از حیث مکانیزم براده‌برداری و همچنین رفتار ماده ارائه می‌دهد.

واژه‌نامه

ابزار الماس تک کریستال	Single Crystal Diamond tool (SCD)
اتم‌های دماثابت	Thermostat atoms
آسیب‌های زیرسطحی	Subsurface damages
برهم‌کنش‌های پیوندی	Bonded interaction
پتانسیل اندرکنش	Interaction potential
پتانسیل جفتی	Pair potential
پتانسیل جفتی	Pair potentials
پرداخت سطحی	Surface finish
تابع پتانسیل استیلینگر-وبر	Stillinger-Weber potential function
تابع پتانسیل تحلیلی	Analytical potential
تابع پتانسیل ترسوف	Tersoff potential function
تابع پتانسیل مورس	Morse potential function
تحلیل همسایگی مرسوم	Common Neighbor Analysis (CNA)
تحول فازی قطعه‌کار	Material phase transformation
ترک‌های ناشی از برش ترد	Brittle fracture
تعادل‌رسانی	Equilibration
ثابت شبکه	Lattice spacing
روش انتگرال‌گیری ورله سرعتی	Velocity verlet algorithm
روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی	Molecular dynamics simulation
روش مقیاس‌دهی	Scaling
زاویهٔ آزاد ابزار	Flank angle
زاویهٔ پیشانی ابزار	Rake angle
ساختار کریستالی الماس مکعبی	Cubic diamond
سلول شبیه‌سازی	Simulation cell
سیلیکون آمورف	Amorphous silicon
شعاع لبهٔ ابزار	Tool edge radius
شعاع لبهٔ ابزار برشی	Cutting edge radius

شکل ظاهری براده	Chip morphology	مکانیزم تشکیل براده	Chip formation
عمق برش	Depth of cut	نرم‌افزار اوویتو	OVITO
لیسه‌کاری	Lapping	نرم‌افزار لمپس	LAMMPS
ماشین‌کاری حالت نرم (چکش‌خوار)	Ductile mode machining	نیروی عمودی	Thrust force
ماشین‌کاری نانومتری	Nanometric machining	هنگرد	Ensemble

مراجع

1. Mukaida, M. and Yan, J., "Ductile machining of single-crystal silicon for microlens arrays by ultraprecision diamond turning using a slow tool servo", *International Journal of Machine Tools Manufacturing*, Vol. 115, pp. 2–14, (2017).
2. Goel, S., Luo, X., Agrawal, A. and R.L. Reuben, "Diamond machining of silicon: A review of advances in molecular dynamics simulation", *International Journal of Machine Tools Manufacturing*, Vol. 88, pp. 131–164, (2015).
3. Komanduri, R., Chandrasekaran,N. and Raff, L., "MD simulation of exit failure in nanometric cutting", *Material Science Engineering A*, Vol. 311, pp. 1–12, (2001).
4. Cai, M., Li, X. and Rahman, M., "Molecular dynamics modelling and simulation of nanoscale ductile cutting of silicon", *International Journal of Computitional Applied Technology*, Vol. 28, pp. 2–8, (2007).
5. Goel, S., Luo, X., Reuben, R.L. and Rashid, W., "Atomistic aspects of ductile responses of cubic silicon carbide during nanometric cutting", *Nanoscale Research Letters*, Vol. 6, pp. 1-9, (2011).
6. Zhu, Z.W., Liu, M.C. and Zhou, X.Q., "A Study on Nanocutting of Monocrystalline Silicon by Molecular Dynamics Simulation", *Applied Mechanics and Materials*, Vol. 110–116, pp. 5405–5412, (2012).
7. Luo, X., Goel, S. and Reuben, R.L., "A quantitative assessment of nanometric machinability of major polytypes of single crystal silicon carbide", *Journal of the European Ceramic Society*, Vol. 32, pp. 3423–3434, (2012).
8. He, L., Zhu, F., Liu, Y. and Liu, S., "Investigation of machining mechanism of monocrystalline silicon in nanometric grinding", *AIP Advances*, Vol. 7, pp. 1-9, (2017)
9. ZareChavoshi, S., Xu, S. and Luo, X., "Dislocation-mediated plasticity in silicon during nanometric cutting: A molecular dynamics simulation study", *Material Science in Semicondconductor Processing*, Vol. 51, pp. 60–70, (2016).
10. Jorgensen, W.L., Chandrasekhar, J., Madura, J.D., Impey, R.W. and Klein, M.L., "Comparison of simple potential functions for simulating liquid water", *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 79, pp. 926–935, (1983).
11. Satoshi, H., Hiroaki, O. and Hideaki, Y., "On Interatomic Potential Functions for Molecular Dynamic (MD) Simulations of Plasma-Wall Interactions", *Journal of Plasma and Fusion Research*, Vol. 6, pp. 80–83, (2004).
12. Samela, J., Nordlund, K., Keinonen, J. and Popok, V.N., "Comparison of silicon potentials for cluster bombardment simulations", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, Vol. 255, pp. 253–258, (2007).
13. Rentsch, R. and Inasaki, I., "Molecular Dynamics Simulation for Abrasive Processes", *CIRP Annals*, Vol. 43, pp. 327-330 , (1994).

14. Li, Z.Q., Sun, T., Da Yan, Y., Zhang, J.J., Liang, Y.C. and Dong, S., "Lapping Process of Diamond Cutting Tool by Molecular Dynamics Simulating", *Key Engineering Materials*, Vol. 359–360, pp. 249–253, (2007).
15. Hosseini, S. V., Vahdati, M. and Shokuhfar, A., "Investigation of Interatomic Potential on Chip Formation Mechanism in Nanometric Cutting Using MD Simulation", *Defect and Diffusion Forum*, Vol. 312–315, pp. 983–988, (2011).
16. Oluwajobi, A. and Chen, X., "The effect of interatomic potentials on the molecular dynamics simulation of nanometric machining", *International Journal of Automation and Computing*, Vol. 8, (2011).
17. Oluwajobi, A. and Chen, X., "The Effect of Interatomic Potentials on the Onset of Plasticity in the Molecular Dynamics (MD) Simulation of Nanometric Machining", *Key Engineering Materials*, Vol. 535–536, pp. 330–333, (2013).
18. Oluwajobi, A.O. and Chen, X., "Choosing Appropriate Interatomic Potentials for Nanometric Molecular Dynamics (MD) Simulations", *Key Engineering Materials*, Vol. 686, pp. 194–199, (2016).
19. ZareChavoshi, S., Goel, S. and Luo, X., "Influence of temperature on the anisotropic cutting behaviour of single crystal silicon: A molecular dynamics simulation investigation", *Journal of Manufturing Processes*, Vol. 23, pp. 201–210, (2016).
20. ZareChavoshi, S. and Luo, X., "An atomistic simulation investigation on chip related phenomena in nanometric cutting of single crystal silicon at elevated temperatures", *Compuitional Materials Science*, Vol. 113, pp. 1–10, (2016).
21. Zhang, Z.B. and Urbassek H.M., "Comparative Study of Interatomic Interaction Potentials for Describing Indentation into Si Using Molecular Dynamics Simulation", *Applied Mechanics and Materials*, Vol. 869, pp. 3–8, (2017).
22. Becker, P. and Mana, G., "The Lattice Parameter of Silicon : A Survey", *Metrologia*, Vol. 31, pp. 203–209, (1994).
23. Otieno, T. and Abou-El-Hossein, K., "Molecular dynamics analysis of nanomachining of rapidly solidified aluminium", *International Journal of Advances Manufacturing Technology*, Vol. 94, pp. 121-131, (2017).
24. Lai, M., Zhang, X., Fang, F. and Bi, M., "Fundamental investigation on partially overlapped nano-cutting of monocrystalline germanium", *Precision Engineering*, Vol. 49, pp. 160–168, (2017).
25. Guo, X., Li, Q., Liu, T., Zhai, C., Kang, R. and Jin, Z., "Molecular dynamics study on the thickness of damage layer in multiple grinding of monocrystalline silicon", *Material Science in Semicondconductor Processing*, Vol. 51, pp. 15–19, (2016).
۲۶. عاملی کلخوران، سیدنادر و وحدتی، مهرداد، "بررسی تأثیر ابعاد قطعه‌کار بر ماشین‌کاری نانومتری سیلیکون تک‌کریستال با استفاده از روش دینامیک مولکولی"، مهندسی مکانیک دانشگاه تبریز، (۱۳۹۷).
27. Pastewka, L., Klemenz, A., Gumbsch, P. and Moseler, M., "Screened empirical bond-order potentials for Si-C", *Physical Review B*, Vol. 87, (2013).
28. Tersoff, J., "Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties", *Physical Review B*, Vol. 38, pp. 9902–9905, (1988).
29. Stillinger, F.H. and Weber, T.A., "Erratum: Computer simulation of local order in condensed phases of silicon", Vol. 33, (1986).
30. Stillinger, F.H., Weber, T.A., "Computer simulation of local order in condensed phases of silicon", Physical Review B, Vol. 31, (1985).
31. Wojdyr, M., Khalil, S., Liu, Y. and Szlufarska, I., "Energetics and structure of lang0 0 1rang tilt grain boundaries in SiC", *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 18, (2010).

32. Hossain, M.Z., Hao, T. and Silverman, B., "Stillinger–Weber potential for elastic and fracture properties in graphene and carbon nanotubes", *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 30, (2018).
33. Landman, U., Luedtke, W.D., Barnett, R.N., Cleveland, C.L., Ribarsky, M.W., Arnold, E., Ramesh, S., Baumgart, H., Martinez, A. and Khan, B., "Faceting at the silicon (100) crystal-melt interface: Theory and experiment", *Physical Review Letters*, Vol. 56, pp. 155–158, (1986).
34. Plimpton, S., "Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics", *Journal of Computational Physics*, Vol. 117, pp. 1-19,(1995).
35. Stukowski, A., "Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool", *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 18, (2010).